

Оптическая спектроскопия и необычный температурный сдвиг бесфононных $f-f$ линий люминесценции: $\text{KTaO}_3:\text{Er}$

В.А. Трепаков¹, А.П. Скворцов¹, Z. Potucek^{2,3}, Z. Bryknar³, D. Nuzhnyy², V. Laguta^{2,5},
В.Г. Кузнецов¹, А.А. Гавриков⁴, А. Dejneka²

¹ФТИ им А.Ф. Иоффе, 194021 Санкт-Петербург, Россия
e-mail: trevl@mail.ioffe.ru

²Institute of Physics AS CR, 182 21 Прага, Чехия

³Czech Techn. Univ. in Prague, Faculty of Nucl. Sci. and Phys. Eng., CZ 12000 Прага, Чехия

⁴Санкт-Петербургский государственный университет, 199034 Санкт-Петербург, Россия

⁵Institute of Material Science, NACs of Ukraine, 03680 Kiev, Ukraine

Исследования свойств и индуцируемых примесями фазовых превращений (ФП) практически важных модельных квантовых параэлектриков SrTiO_3 и KTaO_3 являются предметом повышенного интереса исследователей. При этом интерес представляют, как влияние примесей и дефектов на свойства материала, так и влияние высокополяризуемой матрицы с ФП и мягкими модами на структуру и свойства внедряемых примесей. В то время как свойствам SrTiO_3 и KTaO_3 , допированных ионами щелочных, щелочноземельных, переходных металлов и элементами подгруппы ванадия посвящено уже значительное число работ, допирование редкоземельными ионами изучено недостаточно. В этой связи большой интерес представляют исследования свойств $\text{KTaO}_3:\text{Er}$, которые, по нашим данным, до постановки наших работ не проводились.

В настоящей работе представлен обзор выполненных авторами экспериментальных исследований спектров оптического поглощения, ИК отражения, ЭПР, фотолюминесценции монокристаллов $\text{KTaO}_3:\text{Er}$, а также результаты *ab initio* расчётов методом DFT равновесной геометрии и электронной структуры примесных Er^{3+} центров. В экспериментах использовались монокристаллы $\text{KTaO}_3:\text{Er}$ ($\approx 0.05\%$ в шихте) выращенные в Osnabrueck University (Германия). Полученные зависимости комплексной диэлектрической проницаемости в области энергий 30–650 см^{-1} и температур 300–50 К свидетельствуют о том, что допирование эрбием приводит к ужесточению Слэтеровской TO_1 мягкой моды и подавлению сегнетоэлектрической нестабильности KTaO_3 . В области 350–660 нм обнаружены и изучены узколинейчатые спектры, отвечающие внутриконтинуальным $f-f$ переходам с основного $^4I_{15/2}$ на возбужденные уровни $^4F_{9/2}$, $^4S_{3/2}$, $^2H_{11/2}$, $^4F_{7/2}$, $^4F_{5/2}$ ($^4F_{3/2}$), $^2H_{9/2}$, $^4G_{11/2}$ ионов Er^{3+} . Результаты оптических и ЭПР экспериментов указывают на наличие кубических и некубических центров Er^{3+} , находящихся в кристаллической решетке в позициях с различной локальной симметрией. При этом наиболее вероятно, что основными являются орторомбические центры, отвечающие ионам Er^{3+} , замещающим K^+ . В спектрах люминесценции обнаружено большое число узких бесфононных (БФ) линий, отвечающих переходам $^4S_{3/2} \rightarrow ^4I_{13/2}$, $^4F_{9/2} \rightarrow ^4I_{15/2}$ и $^4S_{3/2} \rightarrow ^4I_{15/2}$. Примечательно, что величина температурных сдвигов БФ линий оказалась существенно большей, чем обычно присуще БФ линиям $f-f$ люминесценции трёхзарядных редкоземельных примесей в ионных кристаллах. В качестве одного из механизмов явления рассматривается возможность значительных температурнозависимых искажений Er^{3+} центров в фотовозбуждённых вырожденных состояниях вследствие псевдоэффекта Яна-Теллера в условиях структурной неустойчивости и наличия мягкой фононной Слэтеровской моды в KTaO_3 . В ряде случаев, большой сдвиг может быть связан с температурным перераспределением интенсивностей перекрывающихся спектральных компонент.

Теоретические расчёты выполнены с помощью оборудования и ПО РЦ «Вычислительный центр СПбГУ».

В.А.Т признателен Р.В. Юсупову и Б.З. Малкину за плодотворные обсуждения и полезные замечания.